Изучение электрических и атомных свойств на межзёренной границе в перовскитнах материалах.

Металлогалогенидные перовскиты являются перспективными материалами для построения солнечных элементов благодаря высоким оптоэлектронным свойствам и экономичностью их производства. Эффективность преобразования энергии таких солнечных элементов возросло с 3% в 2009 году до 26% в настоящее время и приблизилось к лучшему результату для солнечных элементов на основе кремния. Однако не смотря на малую предрасположенность к дефектам, эффективность и срок службы перовскитов сильно зависит от количества межзереных границ. В данной работе мы описываем влияние мигрирующих атомов на атомные и электронные свойства. В данной работе расчеты проводились с помощью систем машинного обучения на суперкомпьютере, расположенном в МИЭМ НИУ ВШЭ, а также высокоуровневого языка программирования Python для дальнейшей обработки результатов. С помощью программы Atomsk была задана структура CsPbBr3 с межзеренной границей, методом объединения двух пластин материала в противоположных направлениях. Полученная модель, состоящая из 6400 атомов (47.46 x 53.05 x 106.14 Å) рассчитывалась на суперкомпьютере с помощью кода LAMMPS, обученного на пакете DeePMD-kit для моделирования молекулярной динамики (MD).

Основным методом описания движения атомов является среднеквадратичное смещение. Одним из ключевых предположения в нашей работе являлось то, что атомы брома имеют большую подвижность по оси X, т.е. вдоль межзеренной границы. Что сравнимо с движением по коридору. Однако расчет среднеквадратичного смещения показал одинаковую подвижность атомов во всех направлениях. Однако данный параметр не может показать нам отличие в подвижности атомов вдоль межзеренной границы и внутри чистого материла. Для этого была рассчитано максимальное смещение атомов брома за весь промежуток времени (2нс). Исходя из полученных результатов мы можем сделать вывод, что атомы вдоль границы обладают большей подвижностью и в пике могут удалятся на расстояние в 7 Å относительно своего начального расстояния (что в 3 раза больше, чем межатомное расстояние в структуре).

Для контроля эволюции системы необходимо рассматривать изменения в количестве высокоподвижных атомов (которые мы можем назвать граничными). Для этого были проведены расчеты с чистым материалом (без дефектов), для определения максимально возможного удаления атомов от своего начального положения без изменения центра колебаний. Мы получили значение равное 2.210408 Å, которое использовали как минимальное значения для маркировки высокоподвижных атомов. Логарифмический тип зависимости изменения количества высокоподвижных атомов показывает, что система стремится к стабилизации. Это говорит о том, что начиная с некоторого промежутка времени изменения в структуре будут незначительными.